

06.1;06.1;10;11;12

©1994

УЧЕТ СКАЧКА ПОТЕНЦИАЛА НА ГРАНИЦЕ ДИЭЛЕКТРИКА В МОДЕЛИ ТУННЕЛЬНОГО ЗАЗОРА СТМ С ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПЛЕНКОЙ В ЭМИССИОННОМ РЕЖИМЕ

В.М.Мордвинцев, В.Л.Левин

Важная роль адсорбата в экспериментах, выполняемых с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ), в настоящее время отмечается многими исследователями. Однако, как правило, изучают очень тонкие слои, которые не мешают работе микроскопа в туннельном режиме [1]. Такие тонкие пленки адсорбата при моделировании ситуации на поверхности иногда полезно рассматривать как сплошные диэлектрические слои [2]. В работе [3] показано, что СТМ, работающий в эмиссионном режиме, позволяет диагностировать толстые диэлектрические пленки, в том числе адсорбированные слои, находящиеся в равновесии с газовой фазой при высоких давлениях. Описан эффект переключения величины туннельного зазора СТМ в таких условиях, и получены экспериментальные данные для естественного адсорбированного слоя, образующегося на воздухе на поверхности вольфрама. Там же приведена простая модель, на основании которой можно получить оценки характеристик туннельного зазора и адсорбата. Принятые в ней приближения приводят к линейным уравнениям во всех диапазонах величины туннельного зазора, что значительно упрощает анализ модели и сравнение ее с экспериментом. Тем не менее, модель оказалась достаточно содержательной, чтобы правильно предсказать характерные элементы на зависимости величины туннельного зазора от напряжения на нем. Развитие модели, которое необходимо для более точного описания системы "туннельный зазор с диэлектрической пленкой", предполагает последовательное устранение допущений, принятых в [3]. Это может выявить некоторые дополнительные особенности, утерянные в слишком грубом варианте рассмотрения такой системы, а с другой стороны потребует корректировки полученных из сравнения с экспериментом оценок параметров модели.

В настоящей работе учтен скачок потенциала на границе свободный зазор-диэлектрическая пленка. Величина этого скачка для кристаллического диэлектрика равна средству к электрону. Однако естественный адсорбированный

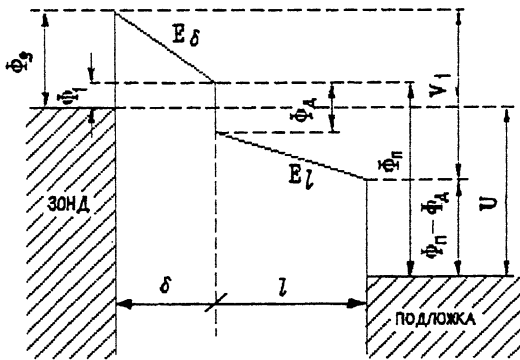


Рис. 1. Потенциальная диаграмма туннельного зазора СТМ при наличии на проводящей подложке образца диэлектрической пленки толщиной l .

слой представляет собой сильно разупорядоченную систему. Поэтому вместо четко фиксированного дна зоны проводимости ниже края подвижности должна существовать непрерывная зона локализованных состояний [4]. Туннелирование электронов из зонда возможно на соответствующие энергетические уровни, а перенос их в диэлектрической пленке — за счет туннелирования по локализованным состояниям, стимулированного эффектом Пула-Френкеля [5]. То есть скачок потенциала на поверхности диэлектрической пленки может быть размыт, а его трактовка не совсем однозначна. Однако при упрощенном феноменологическом рассмотрении это не существенно. Остальные приближения модели приняты такими же, как в [3]. В частности, считается, что ток через систему зонд-подложка лимитируется туннелированием из зонда. Такое приближение кажется вполне обоснованным при не слишком больших туннельных токах.

При высоких напряжениях U на туннельном зазоре и малых толщинах l диэлектрика сохранится ситуация, описанная в [3] и приводящая к линейной зависимости величины свободного зазора δ от $V = V_1 - \phi_d - U - \phi_n + \phi_3$ и l . На рис. 1 показана потенциальная диаграмма при напряжениях V меньших критического

$$V_{\text{кр}} = \phi_3 + \frac{lE_0}{\epsilon}, \quad (1)$$

которому соответствует величина

$$\delta_{\text{кр}} = \frac{\phi_3}{E_0}, \quad (2)$$

где E_0 — напряженность поля в свободном зазоре для $V > V_{кр}$, ϕ_3 и $\phi_п$ — работы выхода из зонда и подложки соответственно, ε — относительная диэлектрическая проницаемость, определение остальных величин ясно из рисунка. Для такой системы, используя процедуру, аналогичную [3], можно получить

$$V = \frac{\phi_3(2E_0^2\delta^2 - \phi_3^2)(\delta + l/\varepsilon)}{E_0^2\delta^3}. \quad (3)$$

В критической точке, определяемой уравнением (1), в отличие от предыдущего варианта [3] не будет скачка величины туннельного зазора, поскольку вертикальный край потенциального барьера на рис. 1 фиксирует его правую границу и постоянство туннельного тока с уменьшением V , когда растет ϕ_1 , будет обеспечиваться просто за счет уменьшения величины δ . Поэтому при $V \leq V_{кр}$ δ будет меняться непрерывно, в то же время производная $d\delta/dV$ будет претерпевать разрыв в точке $V = V_{кр}$, что связано с резким изменением в ней формы барьера (с треугольной на трапециевидную). На рис. 2 приведена теоретическая зависимость от напряжения на зонде СТМ величины изменения полного туннельного зазора ΔZ , измеренной в [3] экспериментально. ΔZ равно разности полных туннельных зазоров при некотором фиксированном напряжении $U = U_c$ и заданном значении U и до вдавливания зонда в диэлектрическую пленку совпадает, с точностью до направления изменения, с соответствующим изменением свободного зазора δ . На линейном участке при $V > V_{кр}$, как показано в [3],

$$\operatorname{tg} \alpha = I/E_0. \quad (4)$$

Производную в точке $V = V_{кр}$ слева легко получить из (3):

$$\frac{d\delta}{dV} = \operatorname{tg} \beta = \frac{1}{2E_0 + \frac{E_0^2 l (\varepsilon - 1)}{\phi_3 \varepsilon}}.$$

Как видно, соответствующий наклон на рис. 2 должен быть более чем в два раза меньше, чем на линейном участке. Такой характер кривой часто наблюдается экспериментально, однако полученная в настоящее время точность эксперимента не позволяет надежно зафиксировать точку перегиба. Совершенствование прибора и методики измерений даст возможность точно устанавливать эту особенность, а значит получать дополнительную информацию о ситуации в туннельном зазоре.

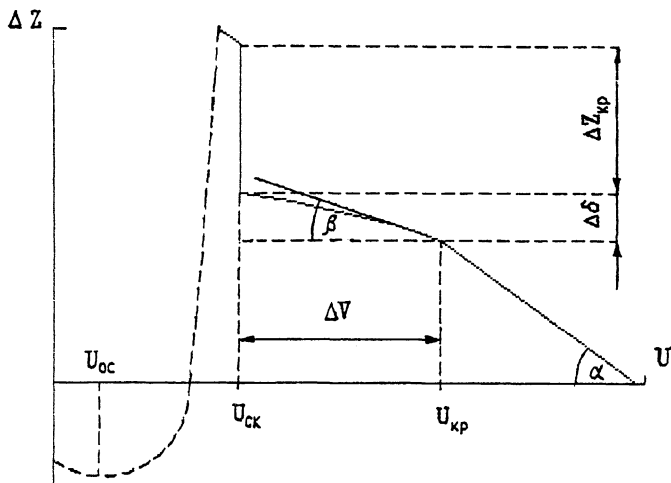


Рис. 2. Теоретическая зависимость величины изменения зазора ΔZ при изменении напряжения на зонде от некоторого постоянного до заданного U от напряжения U .

С дальнейшим уменьшением V свободный зазор δ , а значит, и ΔZ , будут меняться непрерывно вплоть до достижения условия $\phi_I = \phi_d$. В этой точке

$$\delta_{ск} = \frac{\phi_3}{E_0} \left(1 + \frac{\phi_d}{\phi_3} \right)^{-1/2}, \quad (5)$$

$$V_{ск} = \left(1 - \frac{\phi_d}{\phi_3} \right) \left(\phi_3 + \frac{lE_0}{\varepsilon} \left(1 + \frac{\phi_d}{\phi_3} \right)^{1/2} \right). \quad (6)$$

При таком напряжении возникает ситуация, аналогичная той, что была при $V = V_{кр}$ в упрощенной модели [3], т.е. должен наблюдаться скачок величины зазора, соответствующий вдавливанию зонда в диэлектрическую пленку, и стабилизация его на некотором расстоянии Z_0 от подложки. Таким образом, (5) и (6) дают уточненные выражения для параметров эффекта переключения величины туннельного зазора при учете скачка потенциала на границе диэлектрической пленки и свободного зазора. Из уравнений (1), (2) и (5), (6) легко получить выражения для величин ΔV и $\Delta \delta$, показанных на рис. 2. В частности, при условии $\phi_d \ll \phi_3$

$$\Delta V = \phi_d + \frac{lE_0 \phi_d}{2\varepsilon \phi_3}, \quad \Delta \delta = \frac{\phi_d}{2E_0},$$

что можно использовать для оценок соответствующих физических величин из экспериментальных данных.

Величина скачка зазора в точке $V_{ск}$

$$\Delta Z_{ск} = \delta_{ск} + l - Z_0. \quad (7)$$

В отличие от случая $\phi_d = 0$ меньшая прозрачность потенциального барьера, через который туннелируют электроны при $V < V_{ск}$, что собственно и приводит к скачку, не является наглядной. Однако можно строго показать, что и в данном случае это справедливо при толщинах диэлектрической пленки, больших некоторого значения, зависящего от ϵ . После вдавливания зонда СТМ в диэлектрическую пленку высота потенциального барьера ϕ_3 должна уменьшиться на величину ϕ_d . При этом Z_0 определяется из условия одинаковой прозрачности для соответствующих барьеров треугольной формы высотой ϕ_3 и $(\phi_3 - \phi_d)$:

$$Z_0 = Z'_0 \left(1 - \frac{\phi_d}{\phi_3} \right)^{-1/2},$$

где $Z'_0 = V/E_0$ — величина туннельного зазора в однородном по ϵ материале при высоте потенциального барьера ϕ_3 . Таким образом, здесь аналогично [3] предполагается отсутствие сколько-нибудь толстой адсорбированной пленки на поверхности зонда, что, как показывают некоторые экспериментальные результаты, не всегда справедливо. Однако этот вопрос требует отдельного рассмотрения.

Оценим, на сколько существенно учет скачка ϕ_d меняет оценки параметров туннельного зазора и адсорбированного слоя, полученные в [3] из сравнения модели с экспериментальными данными. В связи с невысокой точностью выполненного эксперимента пока нет возможности использовать одно из полученных в данной работе выражений в качестве дополнительного уравнения для независимой оценки величины ϕ_d . Поэтому поставленная задача может быть решена, например, путем априорного задания отношения ϕ_d/ϕ_3 и подстановки его в соответствующие уравнения. Используя справочные [6] величины для работы выхода из вольфрама ($\phi_3 = 4.5$ В) и сродства к электрону для молекулы, например, воды ($\phi_d = 0.9$ В), которая входит в состав адсорбированного слоя, в первом приближении получаем $\phi_d/\phi_3 = 0.2$.

В качестве дополнительного уравнения будем использовать выражение для напряжения во второй особой точке зависимости δ от V , получаемое в том же линейном приближении для $V < V_{ск}$, но при $\phi_d \neq 0$, и с помощью той же

процедуры, что в [3] (как условие равенства нулю знаменателя в выражении для δ):

$$V_{oc} = \frac{\varepsilon\phi_3}{(\varepsilon - 1)} \left(1 - \frac{\phi_d}{\phi_3} \right). \quad (8)$$

Использование линейного приближения в этом случае менее обосновано, чем при $\phi_d = 0$. Однако поскольку эксперимент дает вместо особой точки широкую особую область, в которой поведение системы вообще описывается некоторым другим механизмом, не содержащимся в рассматриваемой модели, соответствующие уточнения пока лишены смысла.

Определяя значения $\text{tg } \alpha$, $U_{ск}$, $\Delta Z_{ск}$ и U_{oc} из экспериментальной зависимости $\Delta Z(U)$, приведенной в [3], и решая систему уравнений (4), (6), (7) и (8) при условии $\phi_3 = \phi_n$, получаем следующие оценки параметров модели (в скобках приведены значения, полученные в [3] при $\phi_d = 0$): $\phi_3 = 3.77$ В (3.16 В), $E_0 = 0.76$ В/нм (0.76 В/нм), $l = 18.5$ нм (17.7 нм), $\varepsilon = 4.1$ (4.7). Напряженность поля в пленке адсорбата при этом составляет $E_l = 1.3 \cdot 10^6$ В/см, что вполне достаточно для обеспечения проводимости по локализованным состояниям за счет эффекта Пула-Френкеля.

Список литературы

- [1] Berthe R., Halbritter J. // Phys. Rev. 1991. V. B43. P. 6880-6884.
- [2] Модинос А. Авто-термо- и вторично-электронная эмиссионная спектроскопия. М.: Наука, 1990. 319 с.
- [3] Мордвинцев В.М., Левин В.Л. // ЖТФ. 1994. (в печати).
- [4] Мотт Н., Дэвис Э. // Электронные процессы в некристаллических веществах. М.: Мир, Т. 1. 368 с.
- [5] Hill R.M. // Phi. Mag. 1971. V. 23. P. 59-86.
- [6] Таблицы физических величин / Под ред И.К.Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1006 с.

Институт микроэлектроники
Ярославль

Поступило в Редакцию
7 октября 1993 г.